

# 基于 Müller-Brown 势的神经网络建模

杨远青 22300190015

CompPhys 24

2025 年 3 月 30 日

## 1 问题描述

### 1.1 函数定义

Müller-Brown 势能函数解析式为：

$$U(x_1, x_2) = s \cdot \sum_{k=1}^4 A_k \exp [\alpha_k (x_1 - a_k)^2 + \beta_k (x_1 - a_k)(x_2 - b_k) + \gamma_k (x_2 - b_k)^2]$$

### 1.2 参数系统

振幅系数:  $\mathbf{A} = (-200, -100, -170, 15)$

二次项参数:  $\boldsymbol{\alpha} = (-1, -1, -6.5, 0.7)$

$\boldsymbol{\beta} = (0, 0, 11, 0.6)$

$\boldsymbol{\gamma} = (-10, -10, -6.5, 0.7)$

中心坐标:  $\mathbf{a} = (1, 0, -0.5, -1)$

$\mathbf{b} = (0, 0.5, 1.5, 1)$

缩放因子:  $s = 0.05$

定义域:  $x_1 \in (-1.5, 1.5), x_2 \in (-0.5, 2)$

势能截断:  $U \leq U_{\text{cut}} = 9$

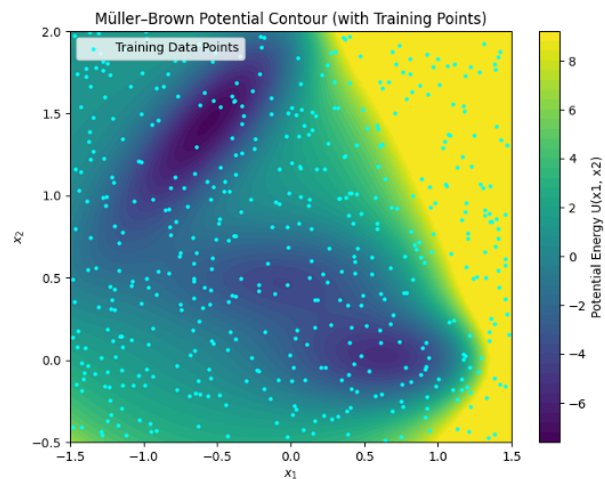


图 1: 待拟合势能面与训练集可视化

### 1.3 评估标准

MAE<sup>1</sup>:

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |U(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}) - U_{\text{NN}}(x_1^{(i)}, x_2^{(i)})|$$

及训练时间等。

<sup>1</sup>最终 MAE 系列评价指标分为：全局 MAE、训练集 MAE、测试集 MAE，其中全局 MAE **不是**训练集和测试集的 MAE 的加权平均值，而是在全势能面上采集的  $(100 \times 100)$  个点（相当于更大的超测试集），与受限于优化采点策略的训练集、测试集，略有不同。

## 2 模型设计

### 2.1 MLPNet

### 2.2 StdNet

### 2.3 ResNet